直方体状領域上の分離型線形偏微分方程式の一般化フーリエ・モード解法について

村上, 弘

数理解析研究所講究録 1335 巻 2003 年 41-48

直方体状領域上の分離型線形偏微分方程式の一般化フーリエ・モード解法について

村上 弘

MURAKAMI HIROSHI

東京都立短期大学 経営情報学科

TOKYO METROPOLITAN COLLEGE, MANAGEMENT AND INFORMATION *

要約: 多次元直方体状領域上で、分離型の線形偏微分方程式を、テンソル積型の基底関数系を用いて離散化し生じる大規模線形方程式を、係数行列の代数的な構造を利用して、反復法ではなくて直接的に、係数行列もその LU 分解も作らず、高速に解く方法 (一般化フーリエ・モード法) について説明する。

1 一次元の場合:

区間 I 上、線形微分作用素 $P = P(x,\partial)$ に対応する微分方程式 $P(x,\partial)f(x) = g(x)$ を考える。今、解 $f(x)$ を区間 I 上の基底関数の組 $\{b_\mu(x)\}$ を導入し c_μ を展開係数として近似し $f(x) \approx \sum_\mu c_\mu b_\mu(x)$ とする。区間 I 上のテスト関数の組 $\{t_\nu(x)\}$ で関数内積を求めれば $\langle t_\nu(x), P(x,\partial)f(x)\rangle_I = \langle t_\nu(x), g(x)\rangle_I$ だから、$\sum_\nu K_{\nu,\mu}c_\mu = d_\nu$ 但し、$K_{\nu,\mu} \equiv \langle t_\nu(x), P(x,\partial)b_\mu(x)\rangle_I$, $d_\nu \equiv \langle t_\nu(x), g(x)\rangle_I$ となり、行列 K を係数とする線形方程式 $Kc = d$ に帰着する。内積の計算は、数値的積分による近似を仮定する。

2 二次元の場合:

領域が積領域 $I = I^{(1)} \times I^{(2)}$, 変数を $x = (x^{(1)}, x^{(2)})$, 内積計算の重みも各次元の重みの積とする。線形偏微分演算子が Separable(分離型,i.e. 各次元の微分演算子の和) $P(x,\partial) \equiv P^{(1)}(x^{(1)}, \partial_{x^{(1)}}) + P^{(2)}(x^{(2)}, \partial_{x^{(2)}})$ に限定する。I 上で微分方程式 $P(x,\partial)f(x) = g(x)$ を考える。$f(x)$ を各次元の基底関数の積で展開:

$$b_\mu(x) \equiv b^{(1)}_{\mu_1}(x^{(1)})\, b^{(2)}_{\mu_2}(x^{(2)}), \quad c_\mu \equiv c_{(\mu_1,\mu_2)},$$
$$f(x) \approx \sum_\mu c_\mu b_\mu(x) = \sum_{(\mu_1,\mu_2)} c_{(\mu_1,\mu_2)} b^{(1)}_{\mu_1}(x^{(1)}) b^{(2)}_{\mu_2}(x^{(2)})$$

されるものとし、テスト関数 $t_\nu(x) \equiv t^{(1)}_{\nu_1}(x^{(1)})\, t^{(2)}_{\nu_2}(x^{(2)})$ との内積をとると: $\langle t_\nu, Pf\rangle_I = \langle t_\nu, g\rangle_I$ より、

$$\sum_{(\mu_1,\mu_2)} \{K^{(1)}_{\nu_1,\mu_1} M^{(2)}_{\nu_2,\mu_2} + M^{(1)}_{\nu_1,\mu_1} K^{(2)}_{\nu_2,\mu_2}\}\, c_{(\mu_1,\mu_2)} = d_{(\nu_1,\nu_2)}.$$

ただし:

$$K^{(1)}_{\nu_1,\mu_1} \equiv \langle t^{(1)}_{\nu_1}, P^{(1)} b^{(1)}_{\mu_1}\rangle_{I^{(1)}}, \quad M^{(1)}_{\nu_1,\mu_1} \equiv \langle t^{(1)}_{\nu_1}, b^{(1)}_{\mu_1}\rangle_{I^{(1)}},$$
$$K^{(2)}_{\nu_2,\mu_2} \equiv \langle t^{(2)}_{\nu_2}, P^{(2)} b^{(2)}_{\mu_2}\rangle_{I^{(2)}}, \quad M^{(2)}_{\nu_2,\mu_2} \equiv \langle t^{(2)}_{\nu_2}, b^{(2)}_{\mu_2}\rangle_{I^{(2)}},$$
$$d_\nu \equiv \langle t_\nu(x), g(x)\rangle_I.$$

*murakami@tmca.ac.jp

すると二次元の Separable な問題は行列 $A_{\nu,\mu} \equiv K^{(1)}_{\nu_1,\mu_1} M^{(2)}_{\nu_2,\mu_2} + M^{(1)}_{\nu_1,\mu_1} K^{(2)}_{\nu_2,\mu_2}$ による線形方程式 $\sum_\mu A_{\nu,\mu} c_\mu = d_\nu$ に帰着する。いま、全体の線形方程式の係数行列 A を、見通しをよくするためテンソル積の記号 $\otimes$ を用いて $A \equiv K^{(1)} \otimes M^{(2)} + M^{(1)} \otimes K^{(2)}$ と表す。そこで、$(K^{(1)}, M^{(1)}),(K^{(2)}, M^{(2)})$ を係数の組とする一般化固有値問題が non-defective(非欠損) であると仮定し、それぞれの一般化固有値分解を: ${W^{(\bullet)}}^T K^{(\bullet)} U^{(\bullet)} = \Lambda^{(\bullet)}$, ${W^{(\bullet)}}^T M^{(\bullet)} U^{(\bullet)} = E^{(\bullet)}$ とし、次に $W^T \equiv {W^{(1)}}^T \otimes {W^{(2)}}^T$, $U \equiv U^{(1)} \otimes U^{(2)}$ と置いて $W^T A U$ を計算すると:

$$
\begin{aligned}
W^T A U &= ({W^{(1)}}^T \otimes {W^{(2)}}^T)(K^{(1)} \otimes M^{(2)} + M^{(1)} \otimes K^{(2)})(U^{(1)} \otimes U^{(2)}) \\
&= {W^{(1)}}^T K^{(1)} U^{(1)} \otimes {W^{(2)}}^T M^{(2)} U^{(2)} + {W^{(1)}}^T M^{(1)} U^{(1)} \otimes {W^{(2)}}^T K^{(2)} U^{(2)} \\
&= \Lambda^{(1)} \otimes E^{(2)} + E^{(1)} \otimes \Lambda^{(2)}
\end{aligned}
$$

と対角行列であり、それを二次元問題の Λ と置く:

$$\Lambda_{\nu,\mu} = \Lambda_{(\nu_1,\nu_2),(\mu_1,\mu_2)} = \delta_{\nu_1,\mu_1}\delta_{\nu_2,\mu_2} \times (\lambda^{(1)}_{\nu_1} + \lambda^{(2)}_{\nu_2}) = \delta_{\nu,\mu} \times (\lambda^{(1)}_{\nu_1} + \lambda^{(2)}_{\nu_2}).$$

$Ac = d$ より、$\Lambda U^{-1} c = (W^T A U) U^{-1} c = W^T d$ だから $c = U \Lambda^{-1} W^T d$, つまり

$$c = (U^{(1)} \otimes U^{(2)})\, \Lambda^{-1}\, (W^{(1)T} \otimes W^{(2)T})\, d.$$

d から c を計算する方法は添字の縮約順序の選び方に対応して一通りではないが、例えば:

$$
\begin{aligned}
d''_\eta &= (W^T\, d\,)_\eta = \sum_\nu W_{\nu,\eta} d_\nu = \sum_{(\nu_1,\nu_2)} W^{(1)}_{\nu_1,\eta_1} W^{(2)}_{\nu_2,\eta_2}\, d_{(\nu_1,\nu_2)} = \sum_{\nu_2} W^{(2)}_{\nu_2,\eta_2} \,(\sum_{\nu_1} W^{(1)}_{\nu_1,\eta_1}\, d_{(\nu_1,\nu_2)}\,), \\
c''_\eta &= (\Lambda^{-1}\, d''\,)_\eta = \Lambda^{-1}_{\eta,\eta}\, d''_\eta = (\lambda^{(1)}_{\eta_1} + \lambda^{(2)}_{\eta_2})^{-1}\, d''_{(\eta_1,\eta_2)}, \\
c_\mu &= (Uc''\,)_\mu = \sum_\eta U_{\mu,\eta}\, c''_\eta = \sum_{(\eta_1,\eta_2)} U^{(1)}_{\mu_1,\eta_1} U^{(2)}_{\mu_2,\eta_2}\, c''_{(\eta_1,\eta_2)} = \sum_{\eta_2} U^{(2)}_{\mu_2,\eta_2} \,(\sum_{\eta_1} U^{(1)}_{\mu_1,\eta_1}\, c''_{(\eta_1,\eta_2)}\,),
\end{aligned}
$$

とする。まとめると:

STEP-1: $d'_{(\nu_2,\eta_1)} \Leftarrow \sum_{\nu_1} d_{(\nu_1,\nu_2)}\, W^{(1)}_{\nu_1,\eta_1}$, $d''_{(\eta_1,\eta_2)} \Leftarrow \sum_{\nu_2} d'_{(\nu_2,\eta_1)}\, W^{(2)}_{\nu_2,\eta_2}$.
STEP-2: $c''_{(\eta_1,\eta_2)} \Leftarrow (\lambda^{(1)}_{\eta_1} + \lambda^{(2)}_{\eta_2})^{-1}\, d''_{(\eta_1,\eta_1)}$.
STEP-3: $c'_{(\eta_2,\mu_1)} \Leftarrow \sum_{\eta_1} c''_{(\eta_1,\eta_2)} (U^{(1)T})_{\eta_1,\mu_1}$, $c_{(\mu_1,\mu_2)} \Leftarrow \sum_{\eta_2} c'_{(\eta_2,\mu_1)} (U^{(2)T})_{\eta_2,\mu_2}$.

により、 $d_\nu = d_{(\nu_1,\nu_2)}$ から $c_\mu = c_{(\mu_1,\mu_2)}$ を計算できる。

3 三次元の場合:

領域 $I = I^{(1)} \times I^{(2)} \times I^{(3)}$, 変数を $x = (x^{(1)}, x^{(2)}, x^{(3)})$, 内積の重み関数も各次元の重み関数の積とする。線形微分演算子が Separable : $P(x,\partial) \equiv P^{(1)} + P^{(2)} + P^{(3)}$ であると限定する: I 上で微分方程式:$P(x,\partial)f(x) = g(x)$ を考え、積型基底関数:$b_\mu(x) = b^{(1)}_{\mu_1} b^{(2)}_{\mu_2} b^{(3)}_{\mu_3}$ を採用すると、解の展開は:

$$f(x) \approx \sum_\mu c_\mu b_\mu = \sum_{(\mu_1,\mu_2,\mu_3)} c_{(\mu_1,\mu_2,\mu_3)} b^{(1)}_{\mu_1} b^{(2)}_{\mu_2} b^{(3)}_{\mu_3}$$

となる。テスト関数 $t_\nu = t^{(1)}_{\nu_1} t^{(2)}_{\nu_2} t^{(3)}_{\nu_3}$ との内積をとれば $\langle t_\nu, Pf \rangle_I = \langle t_\nu, g \rangle_I$ より、

$$\sum_{(\mu_1,\mu_2,\mu_3)} \{K^{(1)}_{\nu_1,\mu_1} M^{(2)}_{\nu_2,\mu_2} M^{(3)}_{\nu_3,\mu_3} + M^{(1)}_{\nu_1,\mu_1} K^{(2)}_{\nu_2,\mu_2} M^{(3)}_{\nu_3,\mu_3} + M^{(1)}_{\nu_1,\mu_1} M^{(2)}_{\nu_2,\mu_2} K^{(3)}_{\nu_3,\mu_3}\} c_{(\mu_1,\mu_2,\mu_3)} = d_{(\nu_1,\nu_2,\nu_3)}$$

$$
\begin{aligned}
K^{(1)}_{\nu_1,\mu_1} &\equiv \langle t^{(1)}_{\nu_1}, P^{(1)} b^{(1)}_{\mu_1}\rangle_{I^{(1)}}\,, \quad M^{(1)}_{\nu_1,\mu_1} \equiv \langle t^{(1)}_{\nu_1}, b^{(1)}_{\mu_1}\rangle_{I^{(1)}}\,,\\
K^{(2)}_{\nu_2,\mu_2} &\equiv \langle t^{(2)}_{\nu_2}, P^{(2)} b^{(2)}_{\mu_2}\rangle_{I^{(2)}}\,, \quad M^{(2)}_{\nu_2,\mu_2} \equiv \langle t^{(2)}_{\nu_2}, b^{(2)}_{\mu_2}\rangle_{I^{(2)}}\,,\\
K^{(3)}_{\nu_3,\mu_3} &\equiv \langle t^{(3)}_{\nu_3}, P^{(3)} b^{(3)}_{\mu_3}\rangle_{I^{(3)}}\,, \quad M^{(3)}_{\nu_3,\mu_3} \equiv \langle t^{(3)}_{\nu_3}, b^{(3)}_{\mu_3}\rangle_{I^{(3)}}\,,\\
d_\nu &\equiv \langle t_\nu(x), g(x)\rangle_I\,.
\end{aligned}
$$

三次元の Separable な問題は $A_{\nu,\mu} \equiv K^{(1)}_{\nu_1,\mu_1} M^{(2)}_{\nu_2,\mu_2} M^{(3)}_{\nu_3,\mu_3} + K^{(1)}_{\nu_1,\mu_1} K^{(2)}_{\nu_2,\mu_2} M^{(3)}_{\nu_3,\mu_3} + M^{(1)}_{\nu_1,\mu_1} M^{(2)}_{\nu_2,\mu_2} K^{(3)}_{\nu_3,\mu_3}$ を係数行列とする線形方程式 $\sum_\mu A_{\nu,\mu} c_\mu = d_\nu$ に帰着する。三次元問題の行列 A を

$$A \equiv K^{(1)} \otimes M^{(2)} \otimes M^{(3)} + M^{(1)} \otimes K^{(2)} \otimes M^{(3)} + M^{(1)} \otimes M^{(2)} \otimes K^{(3)}$$

と書く。各次元の係数行列の組: $(K^{(1)}, M^{(1)})$, $(K^{(2)}, M^{(2)})$, $(K^{(3)}, M^{(3)})$ のそれぞれに対応する一般化固有値問題が non-defective(非欠損) であると仮定し、一般固有値分解を:

$$
\begin{aligned}
&W^{(\bullet)^T} K^{(\bullet)} U^{(\bullet)} = \Lambda^{(\bullet)},\ W^{(\bullet)^T} M^{(\bullet)} U^{(\bullet)} = E^{(\bullet)}\\
&(K^{(\bullet)}, M^{(\bullet)}) \Rightarrow (U^{(\bullet)}, W^{(\bullet)}, \Lambda^{(\bullet)})
\end{aligned}
$$

とする。そこでいま $W^T \equiv W^{(1)^T} \otimes W^{(2)^T} \otimes W^{(3)^T}$, $U \equiv U^{(1)} \otimes U^{(2)} \otimes U^{(3)}$ と置いて、左と右から W,U で A を変換すると $W^T A U = \Lambda^{(1)} \otimes E^{(2)} \otimes E^{(3)} + E^{(1)} \otimes \Lambda^{(2)} \otimes E^{(3)} + E^{(1)} \otimes E^{(2)} \otimes \Lambda^{(3)}$ であり、上式の右辺の対角行列を Λ と置くと $\Lambda_{\nu,\mu} = \Lambda_{(\nu_1,\nu_2,\nu_3),(\mu_1,\mu_2,\mu_3)} = \delta_{\nu,\mu} \times (\lambda^{(1)}_{\nu_1} + \lambda^{(2)}_{\nu_2} + \lambda^{(3)}_{\nu_3})$ である。
$Ac = d$ だから $\Lambda U^{-1} c = (W^T A U) U^{-1} c = W^T d$ により、解の表式は $c = U \Lambda^{-1} W^T d$ となる。

$$c = (U^{(1)} \otimes U^{(2)} \otimes U^{(3)})\, \Lambda^{-1}\, (W^{(1)T} \otimes W^{(2)T} \otimes W^{(3)T})\, d$$

いま、d から c を計算する一つの方法を:

$$
\begin{aligned}
d'''_\eta &= (W^T\, d)_\eta = \sum_\nu {W^T}_{\eta,\nu}\, d_\nu = \sum_\nu W_{\nu,\eta}\, d_\nu = \sum_{(\nu_1,\nu_2,\nu_3)} W^{(1)}_{\nu_1,\eta_1} W^{(2)}_{\nu_2,\eta_2} W^{(3)}_{\nu_3,\eta_3}\, d_{(\nu_1,\nu_2,\nu_3)}\\
&= \sum_{\nu_3} W^{(3)}_{\nu_3,\eta_3} \,(\sum_{\nu_2} W^{(2)}_{\nu_2,\eta_2} \,(\sum_{\nu_1} W^{(1)}_{\nu_1,\eta_1}\, d_{(\nu_1,\nu_2,\nu_3)}\,))\,.\\
c'''_\eta &= (\Lambda^{-1}\, d''')_\eta = \Lambda^{-1}_{\eta,\eta}\, d'''_\eta = (\lambda^{(1)}_{\eta_1} + \lambda^{(2)}_{\eta_2} + \lambda^{(3)}_{\eta_3})^{-1}\, d'''_{(\eta_1,\eta_2,\eta_3)}\,.\\
c_\mu &= (U c''')_\mu = \sum_\eta U_{\mu,\eta}\, c'''_\eta = \sum_{(\eta_1,\eta_2\,\eta_3)} U^{(1)}_{\mu_1,\eta_1} U^{(2)}_{\mu_2,\eta_2} U^{(3)}_{\mu_3,\eta_3}\, c'''_{(\eta_1,\eta_2,\eta_3)}\\
&= \sum_{\eta_3} U^{(3)}_{\mu_3,\eta_3} \,(\sum_{\eta_2} U^{(2)}_{\mu_2,\eta_2} \,(\sum_{\eta_1} U^{(1)}_{\mu_1,\eta_1}\, c''_{(\eta_1,\eta_2)}\,))\,.
\end{aligned}
$$

とすれば、まとめると $d_\nu = d_{(\nu_1,\nu_2,\nu_3)}$ から:

STEP-1(正変換):

$$
\begin{aligned}
d'_{(\nu_2,\nu_3,\eta_1)} &\Leftarrow \sum_{\nu_1} d_{(\nu_1,\nu_2,\nu_3)} W^{(1)}_{\nu_1,\eta_1}\,,\\
d''_{(\nu_3,\eta_1,\eta_2)} &\Leftarrow \sum_{\nu_2} d'_{(\nu_2,\nu_3,\eta_1)} W^{(2)}_{\nu_2,\eta_2}\,,\\
d'''_{(\eta_1,\eta_2,\eta_3)} &\Leftarrow \sum_{\nu_3} d''_{(\nu_3,\eta_1,\eta_2)} W^{(3)}_{\nu_3,\eta_3}\,,
\end{aligned}
$$

STEP-2:

$$c'''_{(\eta_1,\eta_2,\eta_3)} \Leftarrow (\lambda^{(1)}_{\eta_1} + \lambda^{(2)}_{\eta_2} + \lambda^{(3)}_{\eta_3})^{-1} d'''_{(\eta_1,\eta_2,\eta_3)}\,,$$

STEP-3(逆変換):

$$c''_{(\eta_2,\eta_3,\mu_1)} \Leftarrow \sum_{\eta_1} c'''_{(\eta_1,\eta_2,\eta_3)} (U^{(1)T})_{\eta_1,\mu_1} ,$$
$$c'_{(\eta_3,\mu_1,\mu_2)} \Leftarrow \sum_{\eta_2} c''_{(\eta_2,\eta_3,\mu_1)} (U^{(2)T})_{\eta_2,\mu_2} ,$$
$$c_{(\mu_1,\mu_2,\mu_3)} \Leftarrow \sum_{\eta_3} c'_{(\eta_3,\mu_1,\mu_2)} (U^{(3)T})_{\eta_3,\mu_3} ,$$

により、係数 $c_\mu = c_{(\mu_1,\mu_2,\mu_3)}$ を計算できる。

STEP-1(正変換) に現れる添字をセミコロンで区切って二組に分け、縮約を:

$$d'_{(\nu_2,\nu_3);\eta_1} \Leftarrow \sum_{\nu_1} d_{\nu_1;(\nu_2,\nu_3)} W^{(1)}_{\nu_1,\eta_1} ,$$
$$d''_{(\nu_3,\eta_1);\eta_2} \Leftarrow \sum_{\nu_2} d'_{\nu_2;(\nu_3,\eta_1)} W^{(2)}_{\nu_2,\eta_2} ,$$
$$d'''_{(\eta_1,\eta_2);\eta_3} \Leftarrow \sum_{\nu_3} d''_{\nu_3;(\eta_1,\eta_2)} W^{(3)}_{\nu_3,\eta_3} ,$$

と見なせば、それぞれは行列転置積 $D' = D^T W^{(1)}$, $D'' = D'^T W^{(2)}$, $D''' = D''^T W^{(3)}$ である。

STEP-2 で d''' から c''' を求める計算は、各要素にその添字から決まる因子を乗じるだけである。逆数が無限大になる場合は一般逆の意味と解釈する。

STEP-3(逆変換) に現れる添字の縮約を:

$$c''_{(\eta_2,\eta_3);\mu_1} \Leftarrow \sum_{\eta_1} c'''_{\eta_1;(\eta_2,\eta_3)} (U^{(1)T})_{\eta_1,\mu_1} ,$$
$$c'_{(\eta_3,\mu_1);\mu_2} \Leftarrow \sum_{\eta_2} c''_{\eta_2;(\eta_3,\mu_1)} (U^{(2)T})_{\eta_2,\mu_2} ,$$
$$c_{(\mu_1,\mu_2);\mu_3} \Leftarrow \sum_{\eta_3} c'_{\eta_3;(\mu_1,\mu_2)} (U^{(3)T})_{\eta_3,\mu_3} ,$$

と見なせば、それぞれは行列転置積 $C'' = C'''^T U^{(1)^T}$, $C' = C''^T U^{(2)^T}$, $C = C'^T U^{(3)^T}$ となる。

変換の式の主要計算部分は $Y = \mathrm{TMUL}(X, S) \equiv X^T S$ の形式の行列転置積であり、三次元問題では 6 回、二次元問題では 4 回使われる。係数 d から c を求めるには、次元と同じ個数の添字を持つ量を記憶できる場所を二個用意し、計算途中の右辺と左辺に割り当てて交互に使えばよい。

4 基底関数について:

本論文では残念ながら紙数の関係で、採用する基底関数の例の詳細な記述は省略する。基底関数については、各次元で区分的な多項式基底を用いるのが計算上もっとも便利である。ニ階楕円型偏微分方程式の場合、FEM の変分定式化 (部分積分を一回行った形式) を採用すれば、基底関数は区分的に連続でありさえすればよい。各区分区間内で高次の多項式を割り当てることができる。(例:積分 Legendre 多項式、Lagrange 内挿多項式等) 基底関数の台が区間内あるいは隣接区間までに納まる性質は適切に有効利用する。

自己随伴な偏微分方程式の場合には、解の展開に用いる基底関数系と試行関数に用いる基底関数系を等しくとれば、行列 K,M は対称となり、一般化固有値問題が実数のみの固有値、固有ベクトルを持つほか、左右の固有ベクトルが一致するので計算が著しく容易になる。

5 Separableから少し一般化:

二次元の例をとる。領域を区間の積領域とし、内積の重み関数を各次元の重み関数の積とする。二次元線形偏微分演算子 P として次の形のものに一般化する。$P^{(\bullet)}, Q^{(\bullet)}$ を一変数 $x^{(\bullet)}$ のみの線形微分演算子とする。$\alpha^{(\bullet,\bullet)}$ を定数として、二次元線形偏微分作用素を:

$$P \equiv \alpha^{(1,1)}P^{(1)}P^{(2)} + \alpha^{(1,0)}P^{(1)}Q^{(2)} + \alpha^{(0,1)}Q^{(1)}P^{(2)} + \alpha^{(0,0)}Q^{(1)}Q^{(2)}$$

とする。(注意:k-次元の場合は、上記の式の項数が 2^k となる。) 一次元演算子の行列要素を:

$$K^{(\bullet)} \equiv \langle t^{(\bullet)}, P^{(\bullet)}b^{(\bullet)}\rangle_{I^{(\bullet)}},\ M^{(\bullet)} \equiv \langle t^{(\bullet)}, Q^{(\bullet)}b^{(\bullet)}\rangle_{I^{(\bullet)}}$$

とする。解の展開:$f(x) \approx \sum_\mu c_\mu b_\mu(x)$ とすると、内積の左辺は $\langle t, Pf\rangle_I = \sum_\mu A_{\nu,\mu} c_\mu$ である。

$$A \equiv \alpha^{(1,1)}K^{(1)} \otimes K^{(2)} + \alpha^{(1,0)}K^{(1)} \otimes M^{(2)} + \alpha^{(0,1)}M^{(1)} \otimes K^{(2)} + \alpha^{(0,0)}M^{(1)} \otimes M^{(2)}.$$

各次元の行列 $(K^{(\bullet)}, M^{(\bullet)})$ の一般固有値分解を $(U^{(\bullet)}, W^{(\bullet)}, \Lambda^{(\bullet)})$ とする。そこで、$U \equiv U^{(1)} \otimes U^{(2)}$, $W \equiv W^{(1)} \otimes W^{(2)}$ と置くと、

$$W^T AU = \alpha^{(1,1)}\Lambda^{(1)} \otimes \Lambda^{(2)} + \alpha^{(1,0)}\Lambda^{(1)} \otimes E^{(2)} + \alpha^{(0,1)}E^{(1)} \otimes \Lambda^{(2)} + \alpha^{(0,0)}E^{(1)} \otimes E^{(2)}$$

は対角行列になるから、それを Λ と置くと $\Lambda_{\nu,\mu} = \delta_{\nu,\mu} \times (\alpha^{(1,1)}\lambda^{(1)}_{\nu_1}\lambda^{(2)}_{\nu_2} + \alpha^{(1,0)}\lambda^{(1)}_{\nu_1} + \alpha^{(0,1)}\lambda^{(2)}_{\nu_2} + \alpha^{(0,0)})$ となる。線形方程式 $Ac = d$ の解法は $c = U\Lambda^{\dagger}W^T d$ で、Separable の場合と Λ の要素の表式が異なる以外は同様になり。三次元以上の場合でも同様になる。

6 計算量について:

直方体状領域の次元数を $D \geq 2$ とする。各次元方向に割り当てる基底の個数を $N_1, N_2, \ldots, N_D$ を $\approx O(n)$ とするとき、直方体状領域内の全自由度は $O(n^D)$ で、そのとき行列乗算を古典的方法で行うならば、右辺の計算も含めての計算量は n に関して $O(n^{D+1})$ となる。Strassen 型の高速行列乗算法を用いるならば計算量の指数を多少下げることができる。

n が数百程度以上と非常に大きくなってくると、(近似度などを度無視した計算量のみの比較は空虚ではあるが、) $O(n^D \log n)$ 的な計算量を持つ方法に比べて $O(n^{D+1})$ は遅いので、領域分割法を用いて本方法を自由度の小さな部分領域内で pre-conditioner として小領域内の方程式を高速に解くのに利用し、全体方程式は反復法により解くのが良いかと思われる。

余談:ある次元の微分作用素と境界条件、選択する基底関数、区間の分割 (格子の配置) がある同じ対称性を満たせば、その次元方向の一般固有値問題がより低次数の問題に分解することが起きる。例えば ある次元方向で左右の反転で微分作用素が不変あるいは符号が変わるならば、基底関数に偶のものと奇のものを考え、そのような基底を採用したと考えた場合のその次元方向に関する行列の K や M の行列は、偶と奇の基底関数に対応する添字間の行列要素が零になるので可約行列であり、W や U で変換する計算がさらに軽減されうる。

7 右辺の計算について:

ガレルキン型離散化近似の右辺 $d_\nu \equiv \langle t_\nu(x), g(x)\rangle_I = \int_I w(x)t_\nu(x)g(x)dx$ の計算について記述する。

一次元の場合:

$d_\nu \approx \sum_q w_q t_\nu(x_q) g(x_q) = \sum_q T_{\nu,q} g_q$, ここで $\{x_q\}$,$\{w_q\}$ は I 上の重み関数 w に基づく数値積分の分点と重み係数で、 $w_q \equiv w(x_q)$, $g_q \equiv g(x_q)$, $T_{\nu,q} \equiv w_q t_\nu(x_q)$ と置いた。

二次元の場合:

$t_\nu(x) = w^{(1)}(x^{(1)}) w^{(2)}(x^{(2)})$, $w(x)dx = w^{(1)}(x^{(1)}) w^{(2)}(x^{(2)}) dx^{(1)} dx^{(2)}$ であるから,
$d_\nu = \int_{I^{(2)}} dx^{(2)} w^{(2)}(x^{(2)}) t^{(2)}_{\nu_2}(x^{(2)}) \int_{I^{(1)}} dx^{(1)} w^{(1)}(x^{(1)}) t^{(1)}_{\nu_1}(x^{(1)}) g(x^{(1)}, x^{(2)})$ より

$$d_{(\nu_1,\nu_2)} \approx \sum_{q_2} T^{(2)}_{\nu_2,q_2} (\sum_{q_1} T^{(1)}_{\nu_1,q_1} g_{(q_1,q_2)}) = \sum_{q_2} T^{(2)}_{\nu_2,q_2} g'_{q_2,\nu_1}$$

つまり、$g'_{q_2,\nu_1} \Leftarrow \sum_{q_1} T^{(1)}_{\nu_1,q_1} g_{(q_1,q_2)}$, $d_{\nu_1,\nu_2} \Leftarrow \sum_{q_2} T^{(2)}_{\nu_2,q_2} g'_{(q_2,\nu_1)}$ と添字の縮約計算をする。

三次元の場合:

$$d_{(\nu_1,\nu_2,\nu_3)} \approx \sum_{q_3} T^{(3)}_{\nu_3,q_3} \sum_{q_2} T^{(2)}_{\nu_2,q_2} \sum_{q_1} T^{(1)}_{\nu_1,q_1} g_{(q_1,q_2,q_3)} = \sum_{q_3} T^{(3)}_{\nu_3,q_3} \sum_{q_2} T^{(2)}_{\nu_2,q_2} g'_{(q_2,q_3,\nu_1)} = \sum_{q_3} T^{(3)}_{\nu_3,q_3} g''_{q_3,\nu_1,\nu_2}$$

つまり、$g'_{q_2,q_3,\nu_1} \Leftarrow \sum_{q_1} T^{(1)}_{\nu_1,q_1} g_{(q_1,q_2,q_3)}$, $g''_{q_3,\nu_1,\nu_2} \Leftarrow \sum_{q_2} T^{(2)}_{\nu_2,q_2} g_{(q_2,q_3,\nu_1)}$, $d_{\nu_1,\nu_2,\nu_3} \Leftarrow \sum_{q_3} T^{(3)}_{\nu_3,q_3} g''_{(q_3,\nu_1,\nu_2)}$ と添字の縮約計算をする。

微分方程式の右辺の関数 $g(x)$ から、離散化方程式の右辺のベクトル d を計算する際の計算量に関しては, 添字の縮約を行列の古典的乗算法により行えば一次元の場合 $N_1 Q_1$, 二次元の場合 $N_1 Q_1 Q_2 + N_1 N_2 Q_2$, 三次元の場合 $N_1 Q_1 Q_2 Q_3 + N_1 N_2 Q_2 Q_3 + N_1 N_2 N_3 Q_3$ である。N_1, N_2, N_3 は各次元方向の基底関数の個数, Q_1, Q_2, Q_3 は各次元方向のテスト関数との数値積分の分点の個数で N_1, N_2, N_3 の数倍程度である。テスト関数として、区間を分割して区分的多項式を張る基底多項式を採り、基底関数の台が区分区間内または隣接する区分区間までに制限されるならば、変換行列 $T^{(1)}, T^{(2)}, T^{(3)}$ は、列の中に非零要素がほぼ、基底多項式の次数の数倍以下程度になる。その非零の数を L_1, L_2, L_3 程度とすれば上記は一次元の場合 $N_1 L_1$, 二次元の場合 $N_1 Q_2 L_1 + N_1 N_2 L_2$, 三次元の場合 $N_1 Q_2 Q_3 L_1 + N_1 N_2 Q_3 L_2 + N_1 N_2 N_3 L_3$ となるので区分多項式の次数の数倍程度に該当する L_1, L_2, L_3 が n について $O(1)$ とすれば、右辺を作る計算量は D 次元の場合 $O(n^D)$ になる。

8 差分近似の場合:

格子点上での微分方程式の解の離散近似を構成する場合に、領域が二次元の積領域で、演算子 P が線形で Separable な偏微分方程式 $P(x,\partial)f(x) = g(x)$ とする: $P(x,\partial) \equiv P^{(1)}(x^{(1)}, \partial_{x^{(1)}}) + P^{(2)}(x^{(2)}, \partial_{x^{(2)}})$. 各次元方向の線形演算子の各次元格子点上での差分離散化を $P^{(1)} \Rightarrow K^{(1)}$, $P^{(2)} \Rightarrow K^{(2)}$ とし、$E^{(1)}, E^{(2)}$ を単位行列とし、全体の微分演算子 P の二次元格子点上での差分離散化を $P \Rightarrow A \equiv K^{(1)} \otimes E^{(2)} + E^{(1)} \otimes K^{(2)}$ とする。 $K^{(1)}$ と $K^{(2)}$ に対する (一般的には非対称な) 標準固有値問題 ${W^{(\bullet)}}^T K^{(\bullet)} U^{(\bullet)} = \Lambda^{(\bullet)}$, ${W^{(\bullet)}}^T U^{(\bullet)} = E^{(\bullet)}$ をそれぞれ考え、さらに $U \equiv U^{(1)} \otimes U^{(2)}$, $W \equiv W^{(1)} \otimes W^{(2)}$ とおくと, U と W による A の変換 $W^T A U = \Lambda^{(1)} \otimes E^{(2)} + E^{(1)} \otimes \Lambda^{(2)} = \Lambda$ により生じる行列 Λ は対角行列だから、全体の線形方程式が $Ac = d$ なら、解 c は $c = (U \Lambda^\dagger W^T) d = (U^{(1)} \otimes U^{(2)}) \Lambda^\dagger ({W^{(1)}}^T \otimes {W^{(2)}}^T)$ と、一般化フーリエ・モード法で求められる。三次元以上も同様である。

9 雑多:

分離型の線形偏微分方程式の例には、Poisson 方程式, Helmholz 方程式などのように応用上重要なものがある。係数行列の導出法が本文章中の説明とは異なる場合 (例えば変分法) であっても、要するに多次元問題の離散化された線形方程式の係数行列 A が領域が三次元のとき

$$A \equiv K^{(1)} \otimes M^{(2)} \otimes M^{(3)} + M^{(1)} \otimes K^{(2)} \otimes M^{(3)} + M^{(1)} \otimes M^{(2)} \otimes K^{(3)}$$

と書かれる、あるいはより一般的に $\alpha^{(\bullet,\bullet,\bullet)}$ を定数係数として:

$$
\begin{aligned}
A \equiv\ & \alpha^{(1,1,1)}K^{(1)}\otimes K^{(2)}\otimes K^{(3)} + \alpha^{(1,1,0)}K^{(1)}\otimes K^{(2)}\otimes M^{(3)} + \alpha^{(1,0,1)}K^{(1)}\otimes M^{(2)}\otimes K^{(3)} \\
+\ & \alpha^{(1,0,0)}K^{(1)}\otimes M^{(2)}\otimes M^{(3)} + \alpha^{(0,1,1)}M^{(1)}\otimes K^{(2)}\otimes K^{(3)} + \alpha^{(0,1,0)}M^{(1)}\otimes K^{(2)}\otimes M^{(3)} \\
+\ & \alpha^{(0,0,1)}M^{(1)}\otimes M^{(2)}\otimes K^{(3)} + \alpha^{(0,0,0)}M^{(1)}\otimes M^{(2)}\otimes M^{(3)}
\end{aligned}
$$

と書かれるならば、適用することができる。多次元直方体状の領域内を各次元の区間の積で分割し、有限要素法あるいは差分法で離散化したと考えるときに、その各次元方向の要素分割は任意あるいは格子は不等間隔でも構わない。

さらに一般的に、実は解析対象の領域が区間の直積ではなくて、低次元の多様体の積集合であっても、基底をそれぞれの多様体上の基底の積の形にとり、重み関数がそれぞれの積で書かれることと、全体の微分作用素がそれぞれの多様体上での線形微分作用素の和でかかれている場合 (Separable な場合) あるいは二種類の線形微分作用素の上記のような組合せで書かれているのであれば、全体の偏微分方程式の離散化により生じる線形方程式は、直方体状領域同様にモード分解で解くことが原理的に可能である。簡単な例は、三次元問題なら直方体領域上で偏微分演算子が $P = P^{(1)} + P^{(2,3)}$ のように部分的に分離される場合である。

本来は偏微分方程式の解法は、境界条件の与え方や適切性を考察すべきであるが、本論では省略する。例えば、二階の楕円型線形偏微分方程式であれば、領域の周上で第一種、第二種、第三種などの境界条件を与えることができる。本法は、直方体型の領域で、境界条件の与え方にも限定がつくが、境界条件に相当する制約条件が規底関数の与え方で処理されて除かれる場合、例えば Dirichlet 境界条件 (第 1 種境界条件) であればあらかじめ境界上で値が 0 を指定した Dirichlet 問題に還元して解くことができる。

本方法は変数分離形の線形偏微分方程式の解析的解法のアナロジーで、数学的にはほぼ自明ではあるが、全体方程式の係数行列の代数的な構造だけにより、離散化近似法による行列の導出の近似法にはよらない部分が主である。計算機での扱いに際し、大次元行列の LU 分解によらず、全体の方程式を反復法によらず解ける利点がある。計算量の主要部はテンソル添字の縮約で、行列の積として扱えて、特に高次元の場合には、並列度が高く比較的高い性能が出せる。(例えば CPU に安価な intel Celeron1.7GHz, P4-Willamette core, 2nd cache 128KB で、i845G の chipset, メモリを PC2100 DDR-SDRAM 1GBytes とし、intel MKL5.2 ライブラリの Level3 BLAS のルーチン DGEMM を適切に用いて 64bit 精度の浮動小数演算を行う場合、計算主要部である添字の縮約の部分で、主記憶に行列全部が乗る場合には、三次元問題での基底のサイズが 30×30×30〜390×390×390 の範囲で約 1.0〜1.7GFlops の演算性能が実測された。性能の表は紙数の関係で割愛する。) 大次元問題では行列積の計算時に混入する丸め誤差は無視できないことがあるが、その影響を減じる為には、連立一次方程式の解法で良く知られた方程式の残差を求める反復改良法を用いることができる。

10 数式処理との関連性:

もし分離型線形微分方程式の右辺がパラメータを含む式の形、例えばパラメータについての多項式として与えられたならば、計算にパラメータを含む式を扱えば、同様にパラメーターを含む近似解が求められるといえる。

参 考 文 献

[1] E. Anderson, Z. Bai, C. Bischof, J. Demmel, J. Dongarra, J.D. Croz, A. Greenbaum, S. Hammarling, A. McKenney, S. Ostrouchov and D. Sorensen, *LAPACK Users' Guide*, SIAM, Philadelphia, 1992.

[2] A.V. Aho, J.E. Hopcroft and J.D. Ullman, 'The Design and Analysis of Computer Algorithms', Addison-Wesley, 1974.

[3] I. Babuska, B.A. Szabo and I.N. Katz, *SIAM J. Num. Anal.*, **18**, p512, (1981).

[4] R. Barret, M. Berry, T. Chan, J. Demmel, J. Donato, J. Dongarra, V. Eijkhout, R. Pozo, C. Romine and H. Vorst, *Templates for the Solution of Linear Systems*, SIAM, Philadelphia, 1993.

[5] W.L. Briggs and T. Turnbull, 'Fast Poisson solvers for MIMD computers', *Parallel Comput.* (Netherlands), **6**, No.3, 265-274(1988).

[6] T.F. Chan, R. Glowinski, J. Periaux and O.B. Widlund Eds., *Domain Decomposition Methods*, SIAM, Philadelphia, 1989.

[7] Y.J.K. Chih and L.H. Auer, 'An iterative solver with a convergence acceleration technique for the pressure field in an uneven spacing grid system', *Mon. Weather Rev.* (USA), **118**, No.7, 1551-1556(1990).

[8] C.R. Crawford, 'Reduction of a Band Symmetric Generalized Eigenvalue Problem', *Comm. ACM* **16**, 41-44(1973).

[9] N. Decker and J. Vanrosendale, 'N89-24113/7/XAB Operator Induced Multigrid Algorithms Using Semirefinement. Apr 89. Final Report', Institute for Computer Applications in Science and Engineering, Hampton, VA. *NASA, Washington, DC.

[10] G.H. Golub and C.F.Van Loan, *Matrix Computations*, 2nd Ed., Johns Hopkins Univ. Press, Baltimore and London, 1989.

[11] M.M. Gupta, 'A Fourth-Order Poisson Solver', *J. Comput. Phys.*, **55**, 166-172(1984).

[12] H. Murakami, "A Fast Direct Solver for Separable Linear PDEs on a Rectilinear Region Discretized by p-version FEM", IBM Kingston SEC Department Research Report, 1991.

[13] H. Murakami, "A Fast Direct Solver for Separable Linear PDEs on a Rectilinear Region Discretized by p-version FEM", 東京都立短期大学経営情報学科研究論叢 (ISSN1343-3202),No.3,37-62 頁,1999 年 3 月.

[14] H. Murakami, V. Sonnad and E. Clementi, 'A Three-dimensional Finite Element Approach Towards Molecular SCF Computations', *Int. J. Quantum. Chem.*, **42**, 785-817(1992).

[15] U. Schumann, 'Comments on A Fast Computer Method for Matrix Transposing and Application to the Solution of Poisson's Equation', *IEEE Trans. Computers*, **3**, 542-543(1973).

[16] P.N. Swarztrauber and R.A. Sweet, 'Vector and parallel methods for the direct solution of Poisson's equation', *J. Comput. Appl. Math.* (Netherlands), **27**, No.1-2, 241-263(1989).

[17] G. Sköllermo, 'A Fourier Method for the Numerical Solution of Poisson's Equation', *Math. Comp.*, **29**, 697-711(1975).

[18] B.A. Szabo and I. Babuska, *Finite Element Analysis*, Wiley, New York, 1991.

[19] M. Vajteršic, *ALGORITHMS FOR ELLIPTIC PROBLEMS*, Kluwer Academic Publishers, London, 1992.

[20] S. Weiwei and N.G. Zamani, 'A fast algorithm for solving the tensor product collocation equations', *J. Franklin Inst.* (UK), **326**, 295-307(1989).

[21] J.H. Wilkinson, *The Algebraic Eigenvalue Problem*, Oxford University Press, 1965.